数理解析研究所講究録 第2116巻 2019年 171-177

余次元 1 のホモロジー生成元に関するパーコレーション

見上達哉

東北大学大学院理学研究科

Tatsuya Mikami

Mathematical Institute, Tohoku University

1 背景

パーコレーションとは，ランダムに生じる対象のなすクラスターの形を調べる確率論の一分野であり，その最も基本的なモデルとして，d 次元正方格子 $\mathbb{L}^d = (\mathbb{Z}^d, \mathbb{E}^d)$ 上のボンドパーコレーションモデルが挙げられる．これは正方格子の各ボンド $e \in \mathbb{E}^d$ を同確率 $p \in [0,1]$ かつ独立に開くという確率過程を与えるものである．このとき，頂点集合 $\mathbb{Z}^d$ および開いたボンドからなるランダム部分グラフ $K \subset \mathbb{L}^d$ のクラスター（連結成分）のうち，原点を含むものを $C(0)$ と書き，それが格子内において無限グラフとなる**浸透確率** $\theta^{\mathrm{bond}}(p) = P_p(|C(0)| = \infty)$ が，p の関数として定義される．各ボンドの開く確率 p がある値を超えると浸透確率 $\theta^{\mathrm{bond}}(p)$ は正の値をとる．この臨界値 $p_c^{\mathrm{bond}}(d) := \inf\{p \in [0,1] : \theta^{\mathrm{bond}}(p) > 0\}$ を**臨界確率**と呼ぶ．

臨界確率について，任意の空間次元 $d \geq 2$ に対して $0 < p_c^{\mathrm{bond}}(d) < 1$ であることが容易に確かめられる．このモデルの大きな特徴の一つとして，臨界確率前後での相転移現象が観察されることが挙げられるが，それを述べたのが次の定理である．

定理 1.1. $p > p_c^{\mathrm{bond}}(d)$ のとき，ある定数 $c := c(p) > 0$ が存在し，任意の $x, y \in \mathbb{Z}^d$ に対し

$$P_p(x \overset{\mathrm{bond}}{\longleftrightarrow} y) \geq c \tag{1}$$

$p < p_c^{\mathrm{bond}}(d)$ のとき，ある定数 $\sigma := \sigma(p) > 0$ が存在し，任意の $x, y \in \mathbb{Z}^d$ に対し

$$P_p(x \overset{\mathrm{bond}}{\longleftrightarrow} y) \leq e^{-\sigma\|x-y\|_1} \tag{2}$$

ここで，2 頂点 $x, y \in \mathbb{Z}^d$ が開いたボンドの道によって接続される事象を $x \overset{\mathrm{bond}}{\longleftrightarrow} y$ と書いた．上の定理はその接続確率の，2 頂点 x, y の距離に関するふるまいが臨界確率前後で定性的に異なることを述べている．物理の用語を用いて，$p < p_c^{\mathrm{bond}}(d)$ および $p > p_c^{\mathrm{bond}}(d)$ としたときの正方格子の相をそれぞれ**亜臨界相**，**超臨界相**と呼ぶ．亜臨界相における指数減衰 (2) は Menshikov[4] によって得られ，また，超臨界相の評価 (1) は Aizenman, Kesten, Newman[3] による無限クラスターの一意性から従う．ボンドパーコレーション理論の詳細については教科書 [1] を参照されたい．

本研究では，従来のパーコレーションモデルの高次元化のための一考察として，ランダム図形のなす「ホール」即ち，空間次元に対する余次元 1 のホモロジーの生成元のクラスターを調べるパーコレーションモデルを提案する．このモデルを**ホールパーコレーションモデル**と呼ぶ．この研究の背景として，応用・数学的側面から，次の 2 点が挙げられる．

1. **高分子の破壊現象** 「パーコレーション」という言葉が「浸透」と和訳されるように，パーコレーション理論は多孔石岩への水の浸透現象などといった物理的背景を持つ．近年パーコレーション理論との関連が注目されている物理現象として，高分子の破壊現象が挙げられる．論文 [6] では，高分子に張力を加えたときにできる亀裂が，内部に生じる微小な空隙の連なりによって生成されることを示しており，このことは亀裂が「微小な空隙のパーコレーション」として記述されうることを示唆している．本研究では，「空隙の生成」をパーコレーションの枠組みで記述することに焦点を当て，これをホモロジー生成元として表すことを考えた．

2. **ホモロジーに関する高次元** 近年のランダムトポロジーに関する研究の一つの流れとして,「ランダムグラフ理論の高次元化」が挙げられる．例えば，論文 [8] で扱われているランダム方体集合とは，正方格子内の各次元のキューブ（点，線，面，立方体）を確率的に発生させるモデルである．その上で，論文 [8] では，得られるランダム図形の d 次ベッチ数（d 次元の「輪っか」の個数）についての極限定理を得ている．ホモロジー理論の文脈で「連結成分」が 0 次のベッチ数と捉えられることを踏まえれば，これはランダムグラフ理論における連結成分の個数についての考察（e.g. [5]）の，ホモロジーについての高次元版とみることもできるだろう．

   上述のボンドパーコレーションモデルは，ボンドの確率的発生による頂点のつながりをみるモデルであると考えることができる．本研究で提案するホールパーコレーションモデルは，この「頂点」をホモロジーの文脈から 0 次の位相的対象物と捉え，その高次元版として，余次元 1 のホモロジー生成元の確率的なつながりをみるモデルである．

次章において，このモデルを定式化する．

2 ホールパーコレーションモデル

2.1 モデルの構成

以下，空間次元を $d \geq 2$ とする．本研究ではまず，ボンドの高次元版として「面」の確率的な開閉を考える．ここで，面は余次元 1 の基本方体として次のように定義される．記法の詳細については教科書 [7] を参照されたい．

基本区間とは，ある整数 $l \in \mathbb{Z}$ を用いて $I = [l, l+1]$ または $I = [l, l]$ と表される閉区間 $I \subset \mathbb{R}$ のことである．$I = [l, l+1]$ と書けるとき I は**非退化**であるという．d 次元実空間 $\mathbb{R}^d$ 内の**基本方体**を基本区間の d 個の直積 $Q = I_1 \times I_2 \times \cdots \times I_d \subset \mathbb{R}^d$ と定め，その次元を

$$\dim Q = \#\{1 \leq i \leq d : I_i \text{は非退化}\}$$

と定義する．$\mathbb{R}^d$ 内の k 次元基本方体全体を

$$\mathcal{K}_k^d := \{Q = I_1 \times I_2 \times \cdots \times I_d : 基本方体, \dim Q = k\}$$

とかく．$\mathcal{K}_{d-1}^d$ の元を**面**と呼ぶ．

本研究ではまず，ボンドパーコレーションモデルと同様，面 $Q \in \mathcal{K}_{d-1}^d$ をある確率 $p \in [0,1]$ で独立に発生させる過程を考える．状態空間を $\Omega := \{0,1\}^{\mathcal{K}_{d-1}^d}$ と定め，ボンドパーコレーションモデルと同様，確率空間 $(\Omega, \mathcal{F}, P_p)$ を与える．また，二つの面 Q, $Q' \in \mathcal{K}_{d-1}^d$ の隣接を辺の共有，即ち $Q \cap Q' \in \mathcal{K}_{d-2}^d$ であることと定める．面集合 $\mathcal{K}_{d-1}^d$ の "原点"$Q_0 := [0,0] \times [0,1] \times \cdots \times [0,1]$ に対し，それを含む面のクラスターを $C(Q_0)$ とし，ボンドパーコレーションと同様，浸透確率

$$\theta^{\mathrm{face}}(p) = P_p(|C(Q_0)| = \infty)$$

および臨界確率

$$p_c^{\mathrm{face}}(d) = \inf\{p \in [0,1] \,:\, \theta^{\mathrm{face}}(p) > 0\}$$

が定まる．このモデルを**面パーコレーションモデル**と呼ぶ．

一方，本研究で主とするのは，この面の確率的開閉が定める図形の「ホール」の連なりを調べるモデルである．ホールの連なりの情報を持たせた**ホールグラフ**を次で定義する．

面の開閉状態 $\omega \in \Omega$ に対し，枠 $\Lambda^n = [-n,n]^d$ への実現 $K^n(\omega)$ を考える．即ち $K^n(\omega)$ は，Λ^n 内にある開いた面の和である．$K^n(\omega)$ の $(d-1)$ 次体係数ホモロジー群 $H_{d-1}(K^n(\omega)) \simeq \mathbb{K}^{\beta^n}$ の生成元は $K^n(\omega)$ が作る「ホール」，すなわち $\mathbb{R}^d \setminus K^n(\omega)$ の有界連結領域と自然に一対一対応する．

$$\mathbb{R}^d \setminus K^n(\omega) = D_0 \sqcup D_1 \sqcup \cdots \sqcup D_{\beta^n}$$

を非有界連結領域 D_0 および有界連結領域 $D_1, \ldots, D_{\beta^n}$ への一意分解とする．グラフ $G^n(\omega)$ を $D_1, \ldots, D_{\beta^n}$ を頂点とし，隣接関係を

$$D_i \sim D_j \overset{\mathrm{def}}{\Longleftrightarrow} ある面\ Q \in \mathcal{K}_{d-1}^d\ があって\ Q \subset \partial D_i \cap \partial D_j$$

により定めたグラフとする（図 1）．このとき $G^n(\omega)$ は n について単調に増大する．その極限 $G(\omega) = \cup_{n\in\mathbb{N}} G^n(\omega)$ を，面の状態 $\omega \in \Omega$ から誘導されるホールグラフと呼び，その各頂点を**ホール**と呼ぶ．

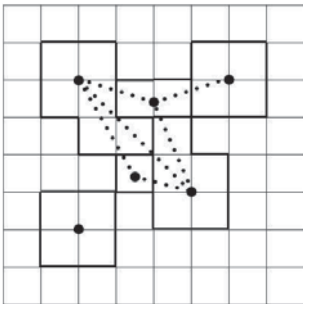

図 1: $d = 2$ の場合．方体集合 X(太線) とそこから誘導されるホールグラフ (点線)

ホールグラフ G の連結成分のうち，$0^* = (1/2, \ldots, 1/2)$ を含むホールを持つものを G_{0^*} とする（存在しないときは $G_{0^*} = \emptyset$ とする）．ホールパーコレーションモデルに関する浸透確率および臨界確率をそれぞれ

$$\theta^{\mathrm{hole}}(p) := P_p(|G_{0^*}(\omega)| = \infty),$$
$$p_c^{\mathrm{hole}}(d) := \inf\{p \in [0,1] : \theta^{\mathrm{hole}}(p) > 0\}$$

と定める．

2.2 双対格子との関係

ホールパーコレーションモデルでは，グラフの頂点（ホール）の生成そのものを確率的に扱う．ホールの生成は，有限領域内の面の開閉状態のみからでは定まらない，大域的な性質である．ここで，正方格子の**双対格子** $(\mathbb{L}^d)^* := \mathbb{L}^d + (1/2, \ldots, 1/2)$，即ち元の格子を各成分 $1/2$ だけ平行移動させたものとの関係を用いて，ホールの生成の特徴づけを行う．双対格子のボンド e^* に対し，その伸びる成分にのみ退化した面 Q_{e^*} を，互いに直交するようにとることが出来，またこの対応は一対一である．双対ボンド e^* の開閉状態を，対応する面 Q_{e^*} の状態と逆相関させることにより確率 $1-p$ の（双対）ボンドパーコレーションモデルを誘導する．ことのき，双対格子 $(\mathbb{L}^d)^*$ 内に得られる有限クラスターは，面のなすホールと対応づけることができる（図 2）．

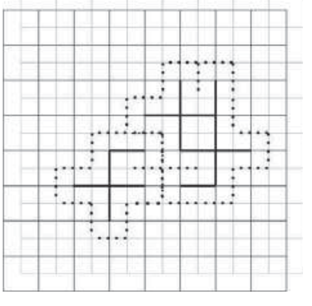

図 2: $d = 2$ の場合．面（点線）のなるホールと，双対ボンドの有限クラスター（太線）

以上の対応関係を用いて，ホールの形成という問題を，双対格子上のボンドクラスターの有限・無限性の問題に帰着させることができる．この議論は本研究全体を通して中心的な役割を果たす.

3 主結果

3.1 臨界確率の評価

まず本研究では，上で定義された臨界確率 p_c^{hole} に対し，次の上下からの評価を得た.

定理 3.1. 任意の $d \geq 2$ に対し，

$$p_c^{\mathrm{face}}(d) \leq p_c^{\mathrm{hole}}(d) \leq 1 - p_c^{\mathrm{bond}}(d).$$

面パーコレーションモデルの臨界確率 $p_c^{\mathrm{face}}(d)$ については，パーコレーション理論の基本的な議論から正であることがすぐに従う．よってこの定理からとくに $p_c^{\mathrm{hole}}(d) \in (0,1)$ であることが従うが，これはホールパーコレーションモデルにおいても亜臨界相，超臨界相の二つが存在することを意味している．

上界については，第 2.2 節で述べた対応関係を用いることですぐに従う．実際，確率 $p > 1 - p_c^{\mathrm{bond}}(d)$ に対しては，$1 - p < p_c^{\mathrm{bond}}(d)$ より双対格子のボンドによるクラスターは全て有限であり，空間 $\mathbb{R}^d$ 内の任意の点がホールによって囲われている．従ってとくにホールグラフが一つの無限クラスターになることが分かるので，臨界確率 $p_c^{\mathrm{hole}}(d)$ は $1 - p_c^{\mathrm{bond}}(d)$ を超えない．

注意 3.2. 2 次元の場合，定理 3.1 から $p_c^{\mathrm{hole}}(2) = 1/2$ であることがすぐに従う．実際，Kesten[2] による $p_c^{\mathrm{bond}}(2) = 1/2$ という結果および，2 次元の面がボンドに相当することを踏まえ，

$$1/2 = p_c^{\mathrm{face}}(2) \le p_c^{\mathrm{hole}}(2) \le 1 - p_c^{\mathrm{bond}}(2) = 1/2$$

を得る．

3.2　無限クラスターの一意性

正方格子上のボンドパーコレーションモデルにおいて，格子内に存在する無限クラスターの個数は高々一つであることが知られている [3]．本研究では，この類似として，ホールパーコレーションモデルにおいても，得られる無限クラスターの個数が高々一つであることを証明した．

定理 3.3. $d \ge 2$ とする．確率変数 N^{hole} を，ホールグラフにおける無限クラスターの個数とする．このとき，$\theta^{\mathrm{hole}}(p) > 0$ ならばほとんど確実に $N^{\mathrm{hole}} = 1$ となる．

ここから，ホールパーコレーションモデルの，超臨界相における接続確率の評価を得ることができる．ここで，双対格子の 2 頂点 x^*, y^* が同一のホールクラスターのホールによって囲われている（即ちホールの道によって接続されている）ことを $x^* \overset{\mathrm{hole}}{\longleftrightarrow} y^*$ と書く．

定理 3.4. $d \ge 2$ とする．$p > p_c^{\mathrm{hole}}(d)$ に対し，ある定数 $c := c(p) > 0$ が存在し，任意の $x^*, y^* \in (\mathbb{Z}^d)^*$ に対し

$$P_p(x^* \overset{\mathrm{hole}}{\longleftrightarrow} y^*) \ge c$$

が成立する．

3.3　クラスターの個数に関する極限定理

材料科学などへの応用を考える際，例えば上述の高分子化合物などの調べたい対象に対し，抽出され得るデータはごく限られた領域に限られることが多い．そのため，得られたデータが元の対象の性質を反映させていることを確かめるには，データのスケール極限に対する振る舞いを調べることが必須である．

本研究では，そのための一考察として，領域 $\Lambda^n = [-n, n]^d$ に制限されたホールグラフのクラスターの個数 K^n_{hole} に対し，その $n \longrightarrow \infty$ での振る舞いとして次の大数の法則が成り立つことを得た．

定理 3.5. $0 < p < 1 - p_c^{\mathrm{bond}}$ とする．定数ある $c > 0$ が存在し，$n \longrightarrow \infty$ のとき

$$\frac{K^n_{\mathrm{hole}}}{|\tilde{B}(n)|} \longrightarrow_{a.s.} c.$$

ただし，E_p は面の開閉に関する確率空間 $(\Omega, \mathcal{F}, P_p)$ における期待値を表す．また，中心極限定理として次を得た．

定理 3.6. $0 < p < 1 - p_c^{\mathrm{bond}}$ とする．面の発生確率 p および空間次元 d のみに依存したある正定数 $\sigma^2 > 0$ が存在し，$n \longrightarrow \infty$ のとき，

$$\frac{1}{|\tilde{B}(n)|} \mathrm{Var}(K^n_{\mathrm{hole}}) \longrightarrow \sigma^2$$

および

$$\frac{1}{|\tilde{B}(n)|^{1/2}} (K^n_{\mathrm{hole}} - E_p(K^n_{\mathrm{hole}})) \longrightarrow_d \mathcal{N}(0, \sigma^2)$$

が成り立つ．ここで $\longrightarrow_d$ は法則収束，$\mathcal{N}(0, \sigma^2)$ は平均 0，分散 σ^2 の正規分布を表す．

4　今後の展望

まず，ホールパーコレーションモデルに関する直近の研究課題として，次が挙げられる．

- ボンドパーコレーションモデルにおいては，Menshikov[4] により接続確率の亜臨界における指数減衰（定理 1.1 (2)）が示されており，超臨界における評価（定理 1.1 ((1)）と合わせて相転移現象を特徴付けている．本研究で提案するモデルにおいては，亜臨界相 $(p < p_c^{\mathrm{hole}})$ における接続確率の収束 $P(x^* \overset{\mathrm{hole}}{\longleftrightarrow} y^*) \longrightarrow 0\,(\|x^* - y^*\| \longrightarrow \infty)$ の速さに関する評価が与えられていない．この評価を与えることが課題の一つである．

- 本研究で与えた臨界確率の評価（定理 3.1）は，$p > 1 - p_c^{\mathrm{bond}}(d)$ の相のみに対し，ホールグラフの無限クラスターの形成を保証する．ただこの確率 p に対しては，第 2.2 節の考察から，ホールグラフは $\mathbb{R}^d$ 全体を占める一つの無限クラスターに限られる．この評価をより厳しく $p_c^{\mathrm{hole}}(d) < 1 - p_c^{\mathrm{bond}}(d)$ と与え，$p_c^{\mathrm{hole}}(d) < p < 1 - p_c^{\mathrm{bond}}(d)$ となる確率 p の存在を示すことで，$\mathbb{R}^d$ 全体を占めない,「形」を持った無限クラスターの存在を確かめたい．

また，本研究で与えたホールパーコレーションモデルは，ホモロジーに着目した高次元化モデルとしての背景を持つ．ただこのモデルにおいて着目しているのは余次元 1 のホモロジー生成元のみであり，今後，一般次元のホモロジー生成元に関して同様のモデルが考えられることが期待される．ただその難点の一つとして，ホモロジー生成元と幾何学的対象との自然な一対一対応を取ることが困難であることがある．例えば図 3 のような，$\mathbb{R}^3$ 内の単位立方体の 1 次スケルトン X とその 1 次ホモロジー（即ち余次元 2 のホモロジー）$H_1(X)$ を

考えると，$\mathrm{rank}H_1(X) = 5$ であるが，そのその生成元を X の「輪っか」という幾何学的対象と自然に一対一対応させることはできない．

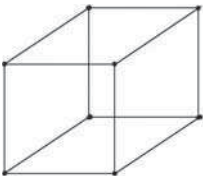

図 3: 立方体の 1 次スケルトン X.

謝辞　本研究は，JST CREST Mathematics 15656429 および JSPS 挑戦的研究（萌芽）17829801 の助成を受けている．

参考文献

[1] G. Grimmett, *Percolation*, 2nd ed., Grundlehren der Mathematischen Wissenschaften [Fundamental Principles of Mathematical Sciences], vol. 321, Springer-Verlag, Berlin, 1999.

[2] H. Kesten, *The critical probability of bond percolation on the square lattice equals* $\frac{1}{2}$, Comm. Math. Phys. **74** (1980), no. 1, 41–59.

[3] M. Aizenman, H. Kesten, and C. M. Newman, *Uniqueness of the infinite cluster and continuity of connectivity functions for short and long range percolation*, Comm. Math. Phys. **111** (1987), no. 4, 505–531. MR901151

[4] M. V. Men′shikov, *Coincidence of critical points in percolation problems*, Dokl. Akad. Nauk SSSR **288** (1986), no. 6, 1308–1311 (Russian).

[5] P. Erdős and A. Rényi, *On the evolution of random graphs*, Magyar Tud. Akad. Mat. Kutató Int. Közl. **5** (1960), 17–61 (English, with Russian summary).

[6] T. Ichinomiya, I. Obayashi, and Y. Hiraoka, *Persistent homology analysis of craze formation*. Phys. Rev. E. **95**, 012504 (2017)

[7] T. Kaczynski, K. Mischaikow, and M. Mrozek, *Computational homology*, Applied Mathematical Sciences, vol. 157, Springer-Verlag, New York, 2004.

[8] Y. Hiraoka and K. Tsunoda, *Limit theorems for random cubical homology*, Discrete Comput. Geom. **60** (2018), no. 3, 665–687, DOI 10.1007/s00454-018-0007-z.